

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局(43) 国際公開日
2005年3月31日 (31.03.2005)

PCT

(10) 国際公開番号
WO 2005/029385 A1

Best Available Copy

(51) 国際特許分類: G06F 19/00
 (21) 国際出願番号: PCT/JP2004/013808
 (22) 国際出願日: 2004年9月22日 (22.09.2004)
 (25) 国際出願の言語: 日本語
 (26) 国際公開の言語: 日本語
 (30) 優先権データ:
 特願2003-329751 2003年9月22日 (22.09.2003) JP
 (71) 出願人(米国を除く全ての指定国について): 日本電気株式会社 (NEC CORPORATION) [JP/JP]; 〒1088001 東京都港区芝五丁目7番1号 Tokyo (JP). 国立大学法人大阪大学 (OSAKA UNIVERSITY) [JP/JP]; 〒5650871 大阪府吹田市山田丘1番1号 Osaka (JP).

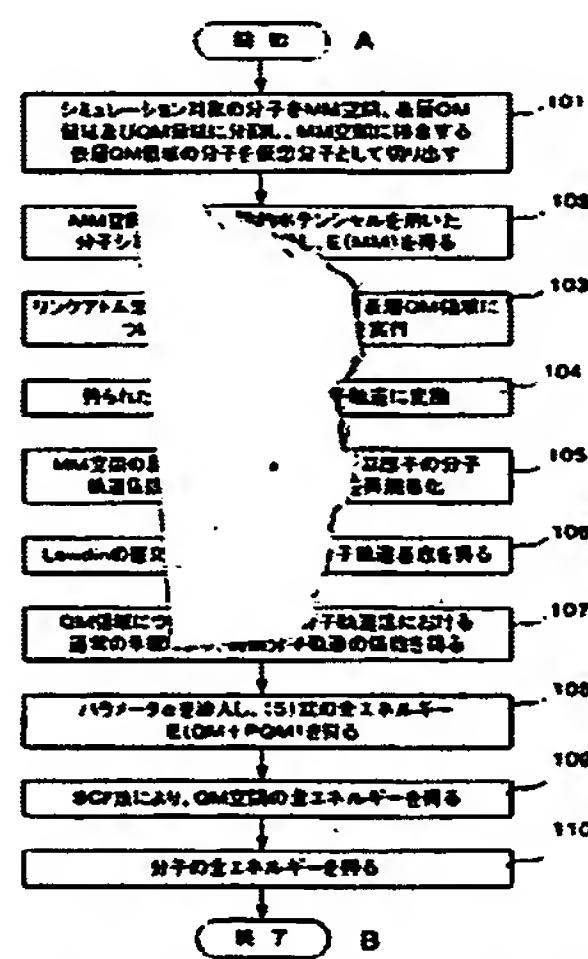
(72) 発明者: および
 (75) 発明者/出願人(米国についてのみ): 一澤 康治 (YONEZAWA, Yasuhide) [JP/JP]; 〒5650875 大阪府吹田市音山台4-1-C 74-305 Osaka (JP). 高田俊和 (TAKADA, Toshihiko) [JP/JP]; 〒1088001 東京都港区芝五丁目7番1号 日本電気株式会社内 Tokyo (JP). 中田一人 (NAKATA, Kazuto) [JP/JP]; 〒1088001 東京都港区芝五丁目7番1号 日本電気株式会社内 Tokyo (JP). 佐久間俊広 (SAKUMA, Toshihiro) [JP/JP]; 〒1088001 東京都港区芝五丁目7番1号 日本電気株式会社内 Tokyo (JP). 中村春木 (NAKAMURA, Haruki) [JP/JP]; 〒5650854 大阪府吹田市桃山台2-7-D 14-206 Osaka (JP).

(74) 代理人: 宮崎昭夫, 外 (MIYAZAKI, Teruo et al.); 〒1070052 東京都港区赤坂1丁目9番20号 第16興和ビル8階 Tokyo (JP).

(総葉有)

(54) Title: MOLECULE SIMULATION METHOD AND DEVICE

(54) 発明の名称: 分子シミュレーション方法及び装置



(57) **Abstract:** There is provided a molecule simulation method for dividing a molecule or a part of molecule to be simulated into a QM space and an MM space and applying a non-empirical molecule orbital method to the QM space and a method based on an empirical potential to the MM space. The molecule simulation method includes a step for acquiring structure data on the molecule or part of molecule to be simulated from a storage section and dividing it into the QM space and the MM space and a step for replacing a part of all energy-expressing equation in the non-empirical molecular orbital method concerning the QM space with an empirical potential.

(57) **要約:** シミュレーション対象の分子または分子の一部をQM空間とMM空間とに分割し、QM空間に対して非経験的分子軌道法を適用し、MM空間に対しては経験的ポテンシャルに基づく方法を適用して分子シミュレーションを行う分子シミュレーション方法は、記憶部から、シミュレーション対象の分子または分子の一部を構造データを取り出してQM空間及びMM空間に分割する段階と、QM空間に関する非経験的分子軌道法における全エネルギー表式の一部を経験的ポテンシャルで置き換える段階と、を有する。

WO 2005/029385 A1

A .. START
 101.. DIVIDE MOLECULE TO BE SIMULATED INTO MM SPACE, SUPERFICIAL QM REGION, AND QM REGION AND CUT OUT MOLECULE IN SUPERFICIAL QM REGION IN JUNCTION WITH MM SPACE, AS VIRTUAL MOLECULE
 102.. EXECUTE MOLECULE SIMULATION USING EMPIRICAL POTENTIAL FOR MM SPACE AND OBTAIN E(MMM)
 103.. CONCEAL NON-PAIR ELECTRON BY LINK ATOM METHOD AND EXECUTE HARTREE-FOCK CALCULATION FOR SUPERFICIAL QM REGION
 104.. CONVERT OBTAINED NORMAL ORBITAL INTO LOCALIZED MOLECULAR ORBITAL
 105.. IGNORE MOLECULAR ORBITAL COEFFICIENT OF HYDROGEN-SIMILAR ATOM POSITIONED OPPOSITE TO MM SPACE AND RENORMALIZE MOLECULAR ORBITAL
 106.. EXECUTE LOWDIN ORTHOGONALIZATION AND OBTAIN LOCALIZED MOLECULAR ORBITAL BASE
 107.. OBTAIN COEFFICIENT OF INITIAL MOLECULAR ORBITAL BY ORDINARY PROCEDURE IN NON-EMPIRICAL MOLECULAR ORBITAL METHOD FOR QM REGION
 108.. INTRODUCE PARAMETER A AND OBTAIN ALL ENERGY E(QM+PCM) OF EQUATION (5)
 109.. OBTAIN ALL ENERGY OF QM SPACE BY THE SCF METHOD
 110.. OBTAIN ALL ENERGY OF MOLECULE
 B .. END